



TITLE:

12. Power Series CAM

AUTHOR(S):

木下, 佳典; 川島, 直輝; 鈴木, 増雄

CITATION:

木下, 佳典 ...[et al]. 12. Power Series CAM. 物性研究 1989, 51(5): 436-439

ISSUE DATE:

1989-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93552>

RIGHT:

12. Power Series CAM

東大・理 木下佳典, 川島直輝, 鈴木増雄

§ 1 CAM理論と近似列

ある物理系の相転移現象を調べる新しい方法である coherent-anomaly method¹⁾ (CAM) は Ising 系をはじめとする多くの物理系でその有効性が確かめられている¹⁻⁷⁾。CAM 理論は、ある物理量 $Q(x)$ の第 n 近似 $Q_n(x)$ の特異点 $x_c^{(n)}$ とその留数 \overline{Q}_n から作られる近似列 $\{x_c^{(n)}, \overline{Q}_n\}$ から $Q(x)$ の臨界点及び臨界指数を求めていく。この時この近似列はある意味で "systematic" であり、近似を高めていくと $x_c^{(n)}$ が真の臨界点 x_c^* に収束することが要求される^{1, 2)}。CAM 理論によってより精度の高い臨界指数を求めようとする時、まずこの近似列を如何にしてうまく作り出すかが問題になる。

Ising 系を調べる cluster mean-field approximation CAM¹⁻³⁾ では、実空間上で原点を中心とする球状クラスターを作ってその中のゆらぎを厳密に計算し、原点での order parameter の期待値が平均場と等しいことを要求して近似列を作っている。この近似法では $x_c^{(n)}$ が x_c^* に収束することが証明されていて²⁾、求められた帯磁率の臨界指数は $\gamma=1.79$ (二次元正方格子 (sq)) 厳密解は $\gamma_{\text{exact}}=1.75$ であった。一方二次元 Ising 系で調べられた transfer matrix approximation CAM⁴⁻⁵⁾ では、半径無限大の円筒上に strip を作ってその中でのゆらぎを transfer matrix を使って厳密に計算し、strip の中心での order parameter の期待値が平均場と等しいことを要求して近似列を作っている。この方法によって得られた計算値 $\gamma=1.749$ (sq) はクラスター法と consistent であり、一方向のゆらぎに関しては既に無限に取り込んでいるため収束も速い。

§ 2 パラメータ展開による CAM

1) power series CAM⁶⁾ と continued fraction CAM⁷⁾

§ 1 で例に上げた 2 つの方法はゆらぎの取り込み、及び self consistent の条件付けを実空間上で "目に見える形で" 行っているのに対し、power series CAM 及び continued fraction CAM は取り扱う物理量があるパラメータによる展開式として捉え直すことにより始まる。 $Q(x)$ が原点のまわりに x で展開されているとする。

$$Q_e(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (1)$$

この $Q_e(x)$ について適当な近似法を考えて近似列の組 $\{x_c^{(n)}, \overline{Q}_n\}$ を作り、CAM を適用する。この近似列は、勿論収束に関する条件を満たしていなければならない。cluster や strip をもとにする方法と異なり、(1) においてはもはや平均場近似は意味を持たない。しかし平均場近似によって求められた臨界点はそのまま帯磁率の発散点に当たることを考えて、それに沿う形で (1) の第 n 近似式を定義する。単に (1) を次数 n で切っても近似式としても有限項の多項式に過ぎないため発散点に相当する点を見付けられない。そこで (1) を特異点を持つ形に変形して、その特異点を臨界点と見立てることにする。

power series CAM は第 n 近似として次のもの取る。

$$Q_n(x) = \frac{1}{\sum_{k=0}^M b_k x^k} = Q_e(x) + o(x^n) \quad (2)$$

但し $M = n$

また、continued fraction CAM では同じく、

$$Q_n(x) = \frac{a_0}{1 + c_1 x^{f_1} / (1 + c_2 x^{f_2} / (\dots / (1 + c_n x^{f_n}) \dots))} \quad (3)$$

$$= \frac{\sum_{k=0}^D d_k x^k}{\sum_{k=0}^M b_k x^k} = Q_e(x) + o(x^{F_n})$$

$$\text{但し } F_n = \sum_{k=1}^{n+1} f_k - 1 \quad (4)$$

をとる。

このとき両者とも CAM の近似列 $\{x_c, \overline{Q_n}\}$ として

$$\sum_{k=0}^M b_k x_c^k = 0 \quad (5)$$

$$\overline{Q_n} = \lim_{x \rightarrow x_c} \left\{ \left(1 - \frac{x}{x_c}\right) Q_n(x) \right\} \quad (6)$$

を考えている。

Ising model (sq) の帯磁率の高温展開をこの方法によって解析したところ、臨界指数はそれぞれ $\gamma = 1.72$ (power)、 $\gamma = 1.744$ (cont.) になる。

2) Padé 近似による power series CAM の構成^{7,12)}

power series による近似は、Padé の $[L, M]$ 近似における $L = 0$ の場合に相当する。一般に $L > 0$ の方が近似式として精度が良いことは明らかであり、CAM の近似列としても収束が速いと考えられる。特にゆらぎの大きな系では、近似の度合いを上げて元を展開式 (1) の係数がなかなか一様性を示さず、coherent anomaly がよく見られないと思われるので、近似式としての精度が高いこの方法を採用する方がよい。この場合第 n 近似として、(2) の代わりに、

$$Q_n(x) = \frac{\sum_{k=0}^L d_k x^k}{\sum_{k=0}^M b_k x^k} = Q_e(x) + o(x^n) \quad (7)$$

$$\text{但し } L + M = n \quad (L \geq 0, M > 0) \quad (8)$$

を使う。

(8) からわかるように、 n 次近似といっても $[L, M]$ の取り方によって n 通りあるが、“systematic” という意味で、近似列として例えば $[M, M]$ 近似列 ($M=1, 2, \dots$) をとることができる。またこの外に $[M, M \pm m]$, $[mM, M]$, $[M, mM]$ ($m=1, 2, \dots$) などの列も考えられる。

§ 3 Padé series による応用例

1) 強磁性 Ising 系

強磁性 Ising 系の二次元正方格子について § 2. 2) の方法の有効性について調べた。(1) として帯磁率の高温展開 (21 次まで⁸⁾) をとり、またパラメータは

$$x = \tanh(K) = \tanh(J/k_B T) \quad (9)$$

とした。

一般の $[L, M]$ では、(5) の解が物理的に意味のある範囲に存在しないことが少なくないが、この系でも 29 例 (231 例中) 解がなかった。それ以外の場合について図 1 に示した。

$L = 0$ (power series) の列は他の一連の点列の延長上には乗っていないが、傾きは共通している。また、この図から $L > 0$ の方が収束が速いことがわかる。

$L > 0$ のすべての点について直線近似をしたところ、傾きは

$$\psi = 0.748 \pm 0.005 \quad (10)$$

であり、coherent-anomaly relation から臨界指数は

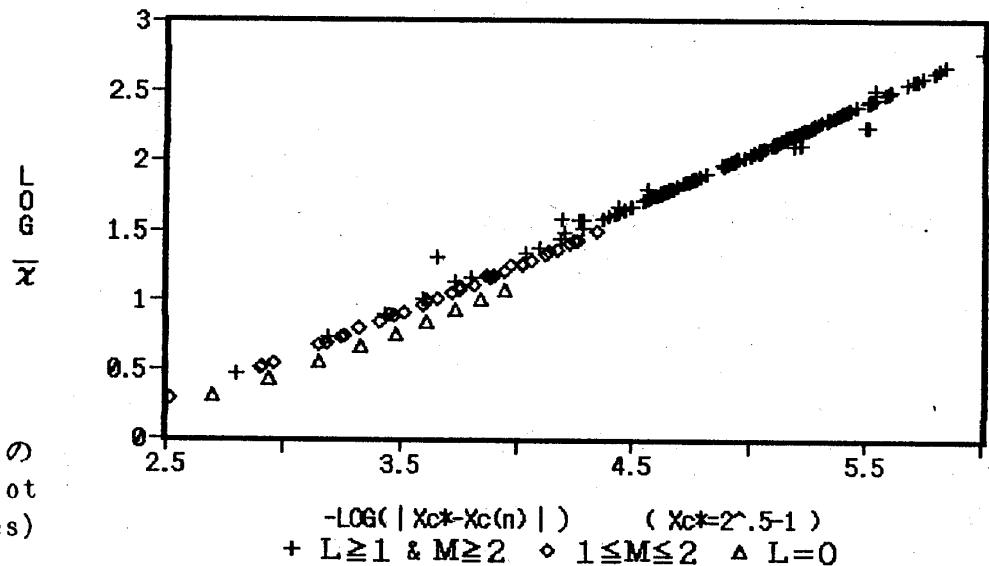
$$\gamma = 1 + \psi \quad (11)$$

$$= 1.748 \pm 0.005 \quad (12)$$

と求まる。

図 1

強磁性 Ising 系の
帯磁率 CAM plot
(Padé series)



2) $\pm J$ Ising spin glass系

ゆらぎの強い系である $\pm J$ Ising spin glass 系について § 2. 2) を適用する。

(1) として Ising spin glass の Edwards-Anderson 帯磁率の高温展開を使う。展開パラメータは

$$w = \tanh^2(K) = \tanh^2(J/k_B T) \quad (13)$$

とした。

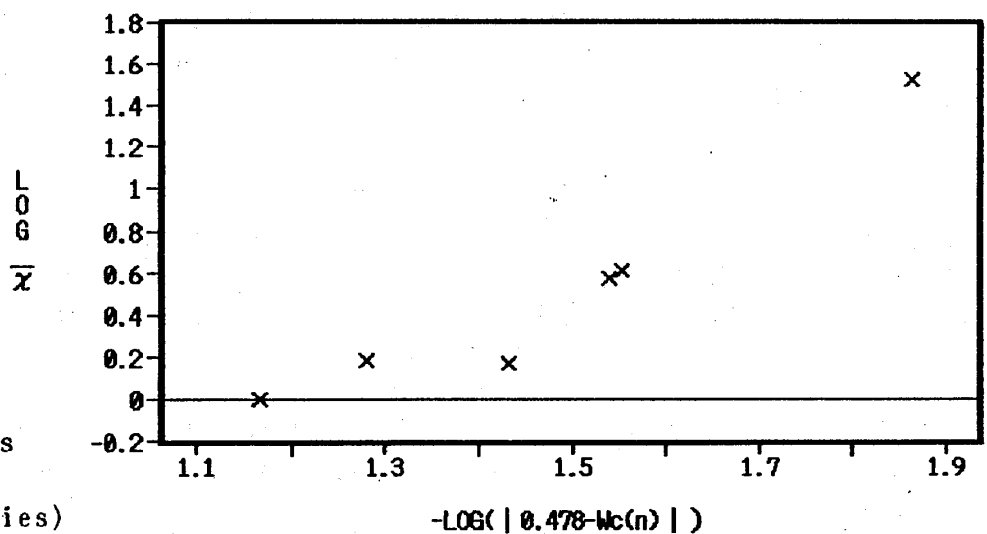
三次元単純立方格子 (17次まで⁹⁾) について行った計算結果を以下に示す。

Ising spin glass は強磁性 Ising 系と比べて、物理的に意味のある (5) の解が存在しないことがはるかに多く (ここでは 64 例 (153 例中) が解なし)、従って全体の点の数が少ないために "systematic" な点列をたどる関数 fitting がしにくい。

図 2 に、得られた点列の中でとりわけ振る舞いの良い列 $[M-1, M]$ を示す。

図 2

Ising spin glass
帯磁率 CAM plot
(Padé $[M-1, M]$ series)



Monte Carlo simulation¹⁰⁾ で得られている $w_{nc}^* = 0.478$ ($T_{nc}^* = 1.175$) を真の値として採用したときの最小二乗直線の傾き ψ 、従って臨界指数 γ は

$$\gamma = 1 + \psi = 3.2 \pm 0.3 \quad (14)$$

となった。

また条件

$$L + M \geq 4, \quad |L - M| \leq 2 \quad (15)$$

にあてはまるすべての点に対して、 w_c^* も未知パラメータとして非線形fittingすると、

$$w_c^{\text{calculated}} = 0.41 \pm 0.08 \quad (T_c^{\text{calculated}} = 1.3 \pm 0.2) \quad (16)$$

$$\gamma = 2.7 \pm 1.2 \quad (17)$$

が得られた。クラスターCAMによる研究も報告されている^{11, 13)}。

他の方法によると、この model の帯磁率臨界指数として

$$w_c = 0.478 \pm 0.013 \quad (T_c = 1.175 \pm 0.025), \quad \gamma = 2.9 \pm 0.3 \quad (18)$$

(Monte Carlo simulation¹⁰⁾)

$$w_c = 0.48 \pm 0.04 \quad (T_c = 1.2 \pm 0.1), \quad \gamma = 2.9 \pm 0.5 \quad (19)$$

(high temperature expansion⁹⁾)

といった値が上がっている。(18), (19)を(14), (16), (17)と比較すると、後者で得られた値は誤差がまだ大きいとはいうものの、真の T_c^* は(18), (19)の値よりもやや大きめであることを示唆している様である。

§ 4 まとめと結論

§ 3. 1)によって、強磁性 Ising model (正方格子)では coherent anomaly がよく見られること、またPadéの[L, M]近似が有効であることがわかる。(12)はクラスター近似等と consistent で収束の速さもそれらに匹敵している。

同じ強磁性 Ising model でも、それぞれの格子によって高温展開の収束の様子に特色が出るため、臨界点の収束の速さ及び臨界指数の精度にも差異が出てくるが、従来からのratio method 及び Baker らによる Padé近似の方法、また power series CAM の解析によって、種々の格子の中でも特に二次元三角格子、三次元面心立方格子の性質が良いことが経験的にわかっている。§ 3. 1)では正方格子のみを扱ったが、この格子で(12)の様な良い結果が得られたことは他の格子でも同等に良い結果が得られることを示している。

spin glassに関しては、ゆらぎが大きいにもかかわらず基になる高温展開の項数が相対的に少ないこと、また実際にPadé近似を行っても物理的に有意味な解が存在しないことが多いことなどにより、sampleとして取れる点の数が少なく臨界点や lower critical dimension等に関するはっきりとした結論は下せない。解析に関しては、近似の度合いがまだ低いことを考慮して、 $x_c^{(n)}$ と x_c^* の関数 $\overline{Q_n}$ (ここでは $\overline{x_n}$)に一次の補正項を加えるなどの工夫によって、改善されると思われる。

※ 参考文献

- 1) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 55('86)4205
- 2) M. Suzuki, M. Katori and X. Hu, J. Phys. Soc. Jpn. 56('87)3092
- 3) M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 56('87)3113
- 4) X. Hu, M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 56('87)3865
- 5) X. Hu and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 57('88)
- 6) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 56('87)4221
- 7) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 57('88)1
- 8) C. Domb in "Phase Transition And Critical Phenomena", Vol. 2, 380
- 9) R. R. P. Singh and S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. 57('86)245
- 10) A. T. Ogielski, Phys. Rev. B 32('85)7384
- 11) M. Suzuki, Phys. Lett. 127A('88)410
- 12) M. Suzuki, J. Stat. Phys. 53('88)483
- 13) 羽田野直道, 鈴木増雄, この報告集参照